

POTENTIAL OF MYRICETIN DERIVATIVES AS ANTIBACTERIAL AGENTS AGAINST *CUTIBACTERIUM ACNES* SIALIDASE THROUGH MOLECULAR DOCKING AND MOLECULAR DYNAMICS

Ramanda Adam
21/472703/PA/20325

ABSTRACT

Cutibacterium acnes (*C. acnes*) is a bacteria that causes skin disorder such as acne which is preventable by targeting sialidase. Out of all natural compounds, myricetin has the potential against skin acne. The aim of this research was to determine the potential of myricetin and its derivatives as inhibitor of *Cutibacterium acnes* surface sialidase through in silico computational methods, including molecular docking and molecular dynamic simulation.

In order to achieve these aims, the study involved several key procedures. The 3D molecular structures of myricetin and its derivatives were optimized using AM1 calculation. The protein structure of *C. acnes* surface sialidase (PDB ID: 7LBU) was prepared using YASARA, followed by redocking the native ligand and molecular docking simulations with minimized myricetin and its derivatives to evaluate the binding energy. The docking results were visualized using DSV (Discovery Studio Visualizer). For molecular dynamics simulations, YASARA was employed with AMBER14 force field under NPT ensemble with the conditions of 310 K and 1 atm for 100 ns at 2.5 fs. MD resulted with RMSD, RMSF, and Rg data.

Redocking the native ligand of the *C. acnes* surface sialidase protein, resulting with a RMSD of 1.68 Å. The molecular docking provides the best interaction from myricetin 3'-O-β-D-glucuronide with the binding energy of -8.13 kcal/mol. Simulation of molecular dynamic proved the stability based on the RMSD, RMSF, and Rg data.

Keywords: *Cutibacterium acnes*, molecular docking, molecular dynamics, myricetin

**POTENSI TURUNAN MIRISETIN SEBAGAI AGEN ANTIBAKTERI
TERHADAP SIALIDASE *CUTIBACTERIUM ACNES* BERDASAR
KAJIAN PENAMBATAN MOLEKUL DAN SIMULASI DINAMIKA
MOLEKULER**

Ramanda Adam
21/472703/PA/20325

INTISARI

Cutibacterium acnes (*C. acnes*) adalah bakteri yang menyebabkan penyakit kulit dengan adanya pertumbuhan jerawat. Hal ini bisa dihindari dengan menargetkan sialidase dari *C. acnes*. Mirisetin merupakan hasil alam yang digunakan dalam riset ini melihat potensinya dalam melawan jerawat. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk menentukan potensi mirisetin dan turunannya sebagai inhibitor yang mampu menghambat *Cutibacterium acnes* sialidase melalui metode komputasi in silico melibatkan penambatan molekuler dan simulasi dinamika molekuler.

Penelitian ini melibatkan beberapa prosedur utama. Struktur molekuler 3D dari mirisetin dan turunannya telah dioptimisasi dengan perhitungan AM1. Struktur protein *C. acnes* sialidase (PDB ID: 7LBU) telah disiapkan dengan YASARA, yang diikuti dengan langkah *redocking* ligan natif dan simulasi dinamika molekuler dengan mirisetin dan turunannya yang telah dioptimisasi untuk mengevaluasi energi ikatnya. Hasil dari penambatan molekul telah divisualisasi dengan DSV (*Discovery Studio Visualizer*). Simulasi dinamika molekuler dilakukan dengan AMBER14 *force field* dalam ansambel NPT dengan kondisi 310 K dan 1 atm selama 100 ns dan langkah waktu 2,5 fs. Simulasi MD menghasilkan data RMSD, RMSF, dan Rg.

Redocking ligan natif dari protein *C. acnes* sialidase, menghasilkan RMSD dengan jumlah 1.68 Å. Penambatan molekul memaparkan interaksi terbaik dari mirisetin 3'-O-β-D-glukuronida dengan energi ikat sebesar -8,13 kcal/mol. Simulasi dinamika molekuler membuktikan stabilitasnya berdasarkan hasil data RMSD, RMSF, dan Rg.

Kata Kunci: *Cutibacterium acnes*, mirisetin, penambatan molekul, simulasi dinamika molekuler